

РЕШЕНИЕ ДВУМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ В МЕТОДИКЕ МИМОЗА С ФОРМИРОВАНИЕМ ОБЩЕЙ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ПО ВСЕЙ ЗАДАЧЕ

Е. Н. Шумкина, А. В. Бабанов

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

Методика МИМОЗА [1] расчета двумерных нестационарных задач газовой динамики с теплопроводностью может успешно применяться для счета достаточно широкого класса задач на регулярных сетках, как в последовательном, так и в многопроцессорном режиме вычислений.

В настоящее время в программе теплопроводности методики МИМОЗА используется пообластный счет. В каждой счетной области строится своя система линейных алгебраических уравнений. На границе соприкасающихся областей используется схема Кондрашова–Загускина [2]. В расчетах, проводимых преимущественно в многопроцессорном режиме, может нарушаться условие устойчивости разностной схемы Кондрашова–Загускина, что приводит к аварийным остановкам задачи.

Для устранения этого эффекта и возможности безавостного счета было решено отказаться от пообластного счета и реализовать в программе теплопроводности построение и решение единой линейной алгебраической системы по всей задаче.

Уравнение теплопроводности

Исходное уравнение теплопроводности [3], записанное относительно функции излучения, имеет следующий вид:

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \operatorname{div}(\chi \operatorname{grad} U) + F, \quad (1)$$

где $E = E(\rho, T)$ – внутренняя энергия; ρ – плотность; χ – коэффициент теплопроводности; $U = T^4$, T – температура; F – источник.

$$\chi = \frac{\sigma c \ell}{3}.$$

Здесь σ – постоянная Стефана–Больцмана; c – скорость света; $\ell(\rho, T)$ – материальный пробег.

Общая схема решения уравнения теплопроводности

Уравнение теплопроводности (1) решается разностным методом [4]. В счетной области выбирается двумерная регулярная сетка в предположении, что каждая ячейка сетки есть 4-угольник.

Энергии, температуры и плотности берутся в центрах ячеек. Изменение энергии в исходной ячейке происходит за счет потоков через 4 грани ячейки. На рис. 1 приведено схематическое представление расчета потока тепла между двумя ячейками.

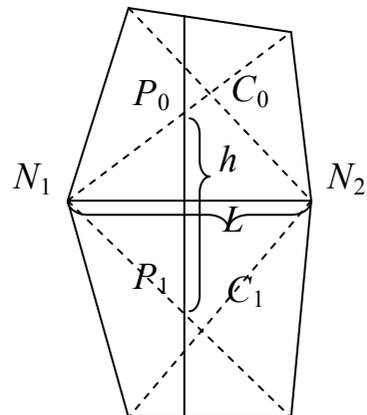


Рис. 1. Схема расчета теплового потока между двумя ячейками: C_0, C_1 – центры ячеек; P_0, P_1 – точки пересечения серединного перпендикуляра с диагоналями соответствующих ячеек

В узлах N_1 и N_2 вводятся дополнительные значения температур. Их определяем арифметическим усреднением температур из четырех соседних ячеек. В точках P_0 и P_1 значения температур рассчитываются линейной интерполяцией по известным значениям в центре и в узле ячейки. Такой способ аппроксимации потоков [5] позволяет получать монотонные решения уравнения теплопроводности на плоских сетках. В результате аппроксимации потоков получается 9-точечная система неявных разностных уравнений.

Также производится линеаризация зависимости внутренней энергии от $U = T^4$, и организуются итерации по нелинейности. На каждой итерации по нелинейности записывается и решается система линейных уравнений. Когда итерации сошлись, по уравнению состояния или с помощью схемы предиктор-корректор восстанавливаются значения внутренней энергии в ячейках расчетной сетки.

Для решения системы линейных уравнений применяются решатели из библиотеки PMLP/Parsol [6].

Построение единой линейной алгебраической системы для решения двумерного уравнения теплопроводности в многообластной постановке

В настоящее время в программе теплопроводности методики МИМОЗА используется пообластной счет. В каждой счетной области строится своя система линейных алгебраических уравнений. На границе соприкасающихся областей используется схема Кондрашова–Загускина [2]. Согласно этой схеме одна из областей объявляется «тяжелой», другая «легкой». Из тяжелой области в легкую передается поток энергии. Из легкой области в тяжелую передается температура.

В ряде расчетов, проводящихся преимущественно в многопроцессорном режиме, может нарушаться условие устойчивости на границе: $\chi_T < \chi_L$.

Здесь χ_T – коэффициент теплопроводности вещества из тяжелой области; χ_L – коэффициент теплопроводности вещества из легкой области.

Для устранения этого эффекта и возможности безавостного счета было решено отказаться от пообластного счета и реализовать в программе теплопроводности построение и решение единой системы линейных алгебраических уравнений по всей задаче.

Вычисление потоков тепла на границах математических областей

При построении единой системы линейных алгебраических уравнений по всей задаче возможно появление локальной нерегулярности на границах математических областей. Одна ячейка на границе может соседствовать с несколькими ячейками из другой математической области, либо только с одной, но их узлы не совпадают.

Рассмотрим фрагмент расчетной сетки, изображенной на рис. 2, и распишем поток энергии в ячейку с номером i , который представляется в виде суммы потоков энергии из соседних ячеек:

$$Q_i^{n+1} = Q_{i,k-1}^{n+1} + Q_{i,k}^{n+1} + Q_{i,k+1}^{n+1}. \quad (2)$$

Первое слагаемое в формуле – поток тепла между ячейками с номерами i и $(k-1)$, второе – поток тепла между ячейками с номерами i и k , третье – поток тепла между ячейками с номерами i и $(k+1)$.

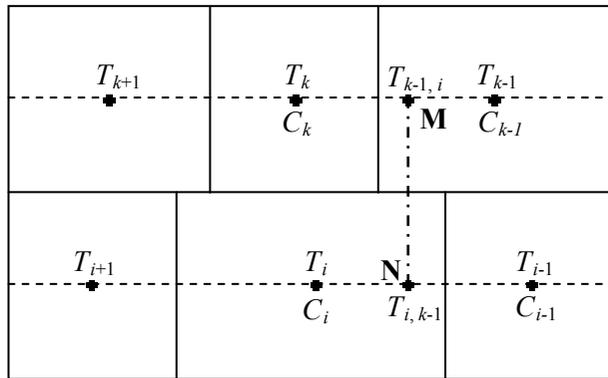


Рис. 2. Фрагмент расчетной сетки

Для определенности приведем формулы и алгоритм нахождения потока тепла между ячейками с номерами i и $(k-1)$: через середину совместной границы ячеек с номерами i и $(k-1)$ проводим перпендикуляр MN до пересечения с отрезками $C_i C_{i-1}$ и $C_k C_{k-1}$ прямых, соединяющих центры ячеек i и $(k-1)$, а также $(k-1)$ и k (рис. 2).

Поток энергии в ячейку с номером i из ячейки с номером $(k-1)$ находится по формуле:

$$Q_{i,k-1}^{n+1} = \chi \frac{T_{k-1,i}^{n+1} - T_{i,k-1}^{n+1}}{h} L. \quad (3)$$

В этой формуле L – длина общего ребра ячеек с номерами i и $(k-1)$, h – длина срединного перпендикуляра MN.

Значения температур $T_{i,k-1}^{n+1}$, $T_{k-1,i}^{n+1}$ в точках M и N находим линейной интерполяцией по формулам:

$$T_{i,k-1}^{n+1} = q_{i,k-1} T_i^{n+1} + (1 - q_{i,k-1}) T_{i-1}^{n+1}, \quad (4)$$

$$T_{k-1,i}^{n+1} = q_{k-1,i} T_{k-1}^{n+1} + (1 - q_{k-1,i}) T_k^{n+1}.$$

Здесь:

$$q_{k-1,i} = \frac{r_{MC_{k-1}}}{r_{MC_{k-1}} + r_{MC_k}}, \quad q_{i,k-1} = \frac{r_{NC_i}}{r_{NC_i} + r_{NC_{i-1}}}. \quad (5)$$

По найденным температурам $T_{i,k-1}^{n+1}$, $T_{k-1,i}^{n+1}$ находят значения коэффициентов теплопроводности в этих точках:

$$\chi_{i,k-1}^{n+1} = \chi_i \left(T_{i,k-1}^{n+1}, \rho_i \right), \quad \chi_{k-1,i}^{n+1} = \chi_{k-1} \left(T_{k-1,i}^{n+1}, \rho_{k-1} \right). \quad (6)$$

Алгоритм распараллеливания метода построения единой системы уравнений

При распараллеливании методики МИМОЗА используются следующие основные принципы:

- каждый процесс хранит в памяти и рассчитывает свой фрагмент задачи;

- все массивы величин, зависящие от числа строк и столбцов, подвергаются декомпозиции, и в оперативной памяти каждого процесса хранятся только нужные для этого процесса сечения массивов;

- для внутренних межпроцессорных границ фрагмента существуют фиктивные границы нахлестов на геометрию соседних фрагментов. Величина нахлеста – 2 слоя ячеек.

Особенностью построения единой системы уравнений по всей задаче является вычисление потоков тепла на границах математических областей. Из-за отсутствия у соседних фрагментов, расположенных в разных областях, зоны перекрытия значительно усложняется алгоритм распараллеливания данного метода. Поэтому следовало реализовать выборку и пересылку данных на границе соседствующих фрагментов разных областей. Для расчета коэффициентов единой системы линейных алгебраических уравнений, соответствующих потокам энергии на границах областей, в параллельном режиме используются формулы и алгоритмы, приведенные в предыдущем разделе, только рассматриваемые для части задачи, находящейся в данном фрагменте.

Распараллеливание метода построения единой системы линейных уравнений по всей задаче осуществляется в несколько этапов:

1. Для текущего фрагмента определяется номер процессора соседнего фрагмента и номер области, рассчитываемой на соседнем фрагменте, а также количество ячеек, принадлежащих одной из сторон совместной границы. **Совместная граница** – граница между соприкасающимися фрагментами соседних математических областей.

2. На текущем фрагменте формируются данные для отправки о рассматриваемых ячейках, расположенных на совместной границе. Заполняются массивы номеров, координат узлов ячеек, а также всех термодинамических величин, необходимых для расчета потока тепла.

3. Осуществляется обмен данными между соседними процессорами, расположенными в разных математических областях. Текущий процессор отправляет соседнему процессору информацию о ячейках со своей стороны совместной границы, а от него получает информацию о ячейках, расположенных по другую сторону совместной границы.

После реализации совместных обменов каждый процессор обладает достаточной информацией для расчета потока тепла на границе областей.

Тестовые расчеты

Задача о распространении тепловой волны в трехслойной системе под углом к границам веществ

Физическая постановка задачи

В начальный момент времени $t = 0$ трехслойная плоская система [7], изображенная на рис. 3, заполнена веществами с различными теплофизическими свойствами в областях I, II и III. В момент времени $t = 0$ начинается подвод тепла через отрезки границы АВ и ВС, в результате чего возникает тепловая волна, которая распространяется влево и вверх по системе.

Уравнение и параметры веществ

Распространение тепла описывается уравнением нелинейной теплопроводности

$$\rho_i \frac{\partial E_i(T)}{\partial t} = \text{div}[\kappa_i(T) \text{grad}U(T)], \quad i = 1, 2, 3, \quad (7)$$

где $U(T) = T^4$, $\kappa_i(T) = \kappa_{i0}T^3$, $i = 1, 2, 3$; $E_i(T) = C_iT + V_iT^4$, $i = 1, 2, 3$.

Значения параметров веществ приведены в табл. 1.

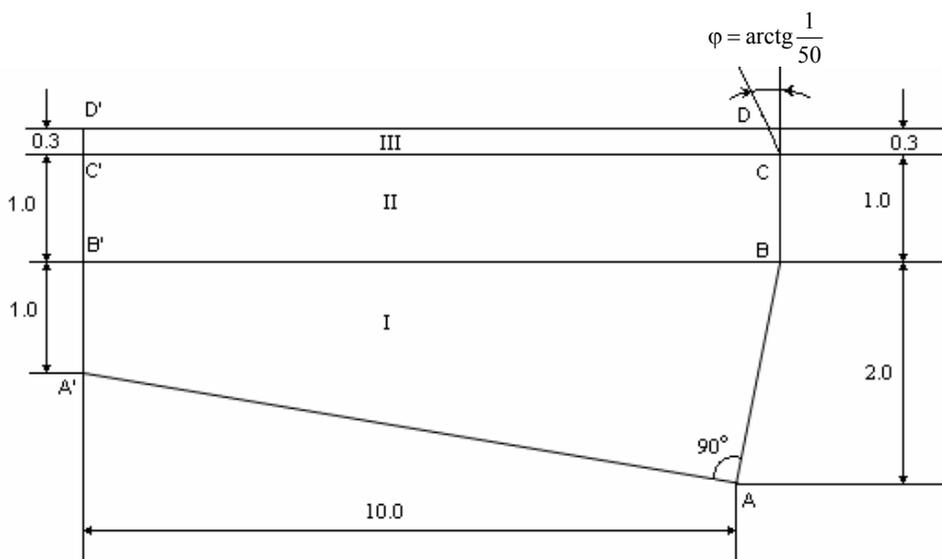


Рис. 3. Геометрия тестовой задачи

Параметры веществ тестовой задачи

Вещество i	1	2	3
ρ_i	1,0	2,0	10,0
κ_{i0}	35,3417941268	7,06835882537	0,0706835882537
C_i	10,0	1,23762376238	4,952475247524
V_i	1,0	0,123762376238	0,4952475247524

Начальные и граничные условия

Начальные условия:

- начальное время $t_0 = 0$;
- начальная температура $T = 0$.

Граничные условия:

• на граничных отрезках AA', A'B', B'C', C'D, D'D, DC поток тепла равен нулю («жесткая стенка»);

• на отрезках АВ и ВС задаются потоки тепла $Q_1(t, y)$, $Q_2(t, y)$ как известные функции времени и координаты.

Граничные потоки тепла вычисляются следующим образом.

Пусть на данном шаге по времени осуществляется переход с момента времени t^n на момент времени t^{n+1} , $\Delta t^{n+1/2} = t^{n+1} - t^n > 0$. За это время через граничную сторону $[Z_j, Z_{j+1}]$ приграничной ячейки пройдет количество энергии, равное

$$\Delta W(t^n, t^{n+1}, Z_j, Z_{j+1}) = W_i(t^{n+1}, Z_j, Z_{j+1}) - W_i(t^n, Z_j, Z_{j+1}). \quad (8)$$

Поэтому средний поток тепла, прошедший за этот шаг по времени через данную сторону ячейки, будет равен

$$Q_{j+1/2}^{n+1/2} = \frac{W_i(t^{n+1}, Z_j, Z_{j+1}) - W_i(t^n, Z_j, Z_{j+1})}{(t^{n+1} - t^n) S_{j+1/2}}, \quad (9)$$

где $S_{j+1/2}$ – площадь данной стороны, в плоском случае это длина стороны.

Суммарный поток энергии $W_i(t, Z_j, Z_{j+1})$ вычисляется по формулам:

$$W_i(t, Z_1, Z_2) = \frac{4\kappa_{i0}\tau_0^7}{7u_i} [a_i(y_1 - y_2) + b_i(x_2 - x_1)] \times \frac{\chi(\theta(\sigma_2)) - \chi(\theta(\sigma_1))}{\sigma_2 - \sigma_1}, \quad i = 1, 2, 3; \quad (10)$$

$$\sigma_j = -\frac{a_j x_j + b_j y_j - u_j(t - t_0)}{\xi_{0j}}, \quad j = 1, 2, \quad i = 1, 2, 3; \quad (11)$$

$$\chi(\theta) = \frac{\theta^{10}}{10} - \frac{\theta^7}{7} + \frac{\theta^4}{4} - \theta + \frac{1}{6} \ln \frac{(\theta+1)^2}{\theta^2 - \theta + 1} + \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{\pi}{6} + \arctg \frac{2\theta - 1}{\sqrt{3}} \right). \quad (12)$$

Функция $\theta(\sigma)$ определяется уравнением

$$\theta^3 - \ln(1 + \theta^3) = 3\sigma, \quad \sigma > 0; \quad (13)$$

$$\theta = 0, \quad \sigma \leq 0.$$

Если $\sigma_2 - \sigma_1 \approx 0$, то есть $|\sigma_2 - \sigma_1| \leq \varepsilon$, где ε – малое положительное число (например, 10^{-7}), то можно использовать приближенную формулу

$$W_i(t, Z_1, Z_2) \approx \frac{4\kappa_{i0}\tau_0^7}{7u_i} [a_i(y_1 - y_2) + b_i(x_2 - x_1)] \times \frac{(\theta(\sigma_2))^7 + (\theta(\sigma_1))^7}{2} = \frac{4\kappa_{i0}}{7u_i} [a_i(y_1 - y_2) + b_i(x_2 - x_1)] \times \frac{(T_i(t, x_1, y_1))^7 + (T_i(t, x_2, y_2))^7}{2}, \quad i = 1, 2, 3; \quad (14)$$

$$|\sigma_2 - \sigma_1| \leq \varepsilon \sim 10^{-7}.$$

Результаты расчетов в последовательном режиме

Расчет проводился в трехобластной постановке на трех типах сеток:

- *первая сетка* – равномерная по обоим направлениям в каждой подобласти (в каждом веществе), с равномерным по расстоянию разбиением отрезков DD', CC', BB', AA' сетка с числом ячеек 10×10 в каждой области (рис. 4);

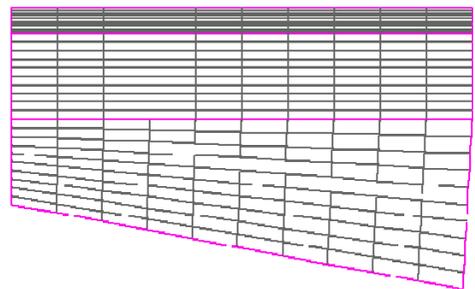


Рис. 4. Расчетная сетка 1

• *вторая сетка* – неравномерная четырехугольная сетка в каждой области. Отрезки DD', CC', BB', AA' разбивались со своими знаменателями (рис. 5).

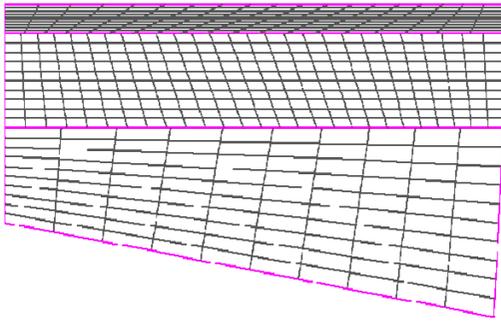


Рис. 5. Расчетная сетка 2

Основной информацией для оценки точности полученного численного решения являются результаты тестовых расчетов на сходимость. Для этого расчеты проводились на каждой из трех сеток с последовательным измельчением ячеек сетки и временного шага в 2 и 4 раза.

На рис. 6–8 приведены результаты расчетов на сходимость, полученные на сетке 1 для каждой области отдельно. На графиках показана зависимость распределения погрешностей в областях от времени.

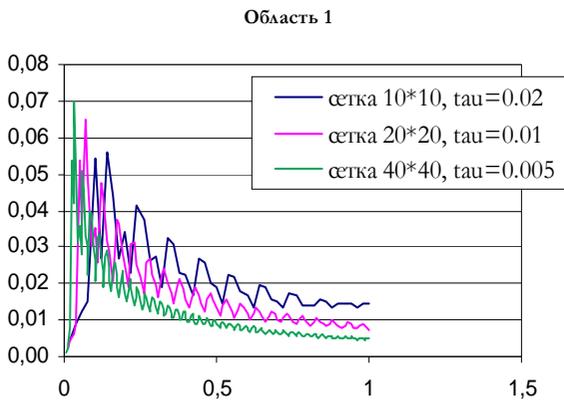


Рис. 6. График зависимости погрешности распределения температуры от времени в области 1

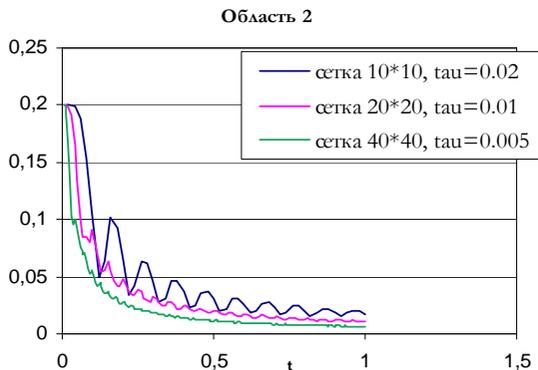


Рис. 7. График зависимости погрешности распределения температуры от времени в области 2

Область 3

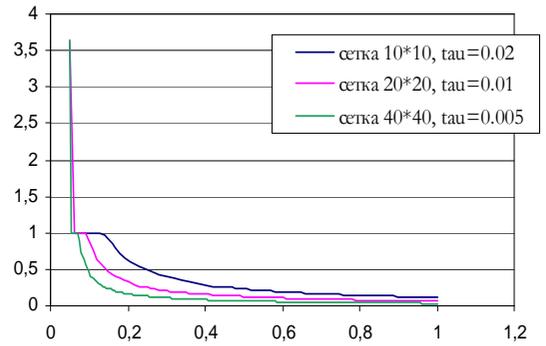


Рис. 8. График зависимости погрешности распределения температуры от времени в области 3

На рис. 9–11 приведены результаты расчетов на сходимость, полученные на сетке 2 для каждой области отдельно. На графиках показана зависимость распределения погрешностей в областях от времени.

Область 1

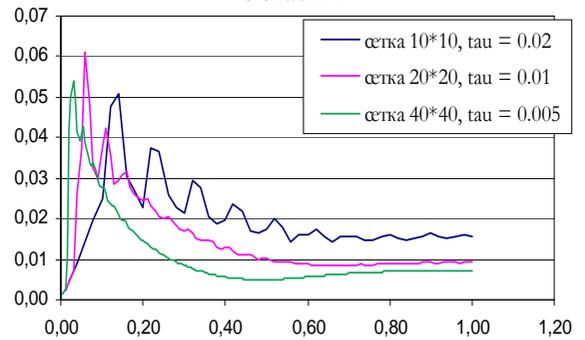


Рис. 9. График зависимости погрешности распределения температуры от времени в области 1

Область 2

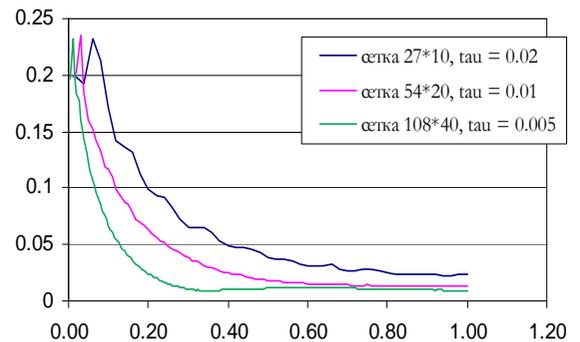


Рис. 10. График зависимости погрешности распределения температуры от времени в области 2

В табл. 2 приведены погрешности распределения температуры на момент времени 1 миг для каждой области отдельно. Кроме того, в данной таблице приводятся погрешности распределения температуры в каждой области в случае счета со схемой Кондрашова–Загускина на границах областей.

Область 3

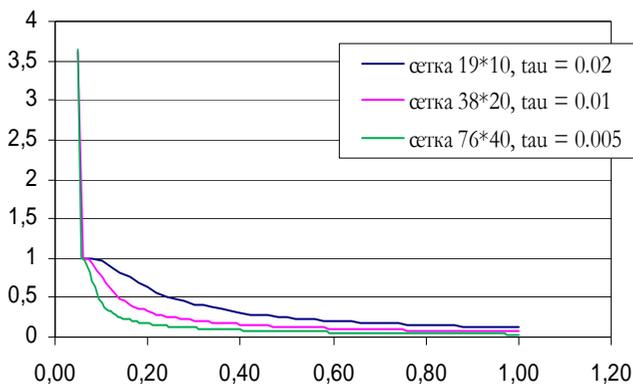


Рис. 11. График зависимости погрешности распределения температуры от времени в области 3

Таблица 2

Погрешности распределения температуры в областях в последовательном режиме

Расчетная сетка 1										
Область I	Область II	Область III	Построение единой системы уравнений				Пообластной счет по схеме Кондрашова–Загускина			
			τ	$\delta_I(t)$	$\delta_{II}(t)$	$\delta_{III}(t)$	τ	$\delta_I(t)$	$\delta_{II}(t)$	$\delta_{III}(t)$
10*10	10*10	10*10	0,02	1,44	1,73	11,41	0,02	1,9	1,59	5,83
20*20	20*20	20*20	0,01	0,74	1,12	6,45	0,01	0,97	0,85	2,64
40*40	40*40	40*40	0,005	0,5	0,63	3,38	0,005	0,48	0,54	1,44
Расчетная сетка 2										
Область I	Область II	Область III	Построение единой системы уравнений				Пообластной счет по схеме Кондрашова–Загускина			
			τ	$\delta_I(t)$	$\delta_{II}(t)$	$\delta_{III}(t)$	τ	$\delta_I(t)$	$\delta_{II}(t)$	$\delta_{III}(t)$
10*10	27*10	19*10	0,02	1,55	2,33	12,12	0,02	2,03	1,97	4,41
20*20	54*20	38*20	0,01	0,93	1,32	6,69	0,01	1,14	1,13	2,61
40*40	108*40	76*40	0,005	0,72	0,89	3,69	0,005	0,96	0,78	2,41

Результаты расчетов в параллельном режиме

Расчет проводился на равномерной по обоим направлениям и с равномерным по расстоянию разбиением границ разностной сетке, схематично представленной на рис. 12. В каждой области бралось разное количество точек (область 1 – 160*200, область 2 – 175*200, область 3 – 200*200).

В табл. 3 приведены погрешности распределения температуры в областях на момент времени 1 миг. Расчет проводился на 24 процессорах (в каждой об-

ласти 8 процессоров). В табл. 4 приведены результаты расчетов на эффективность распараллеливания.

Реализованный в рамках методики МИМОЗА метод построения единой системы линейных алгебраических уравнений для решения двумерного уравнения теплопроводности продолжает развиваться. В настоящее время произведено обобщение метода на случай, когда граничный участок рассматриваемой области соседствует с любой из границ соседней области.

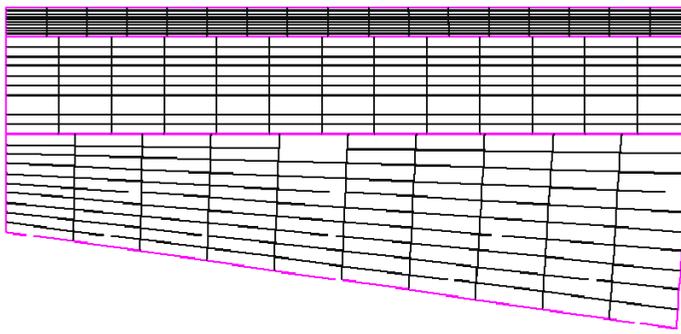


Рис. 12. Расчетная сетка

Таблица 3

Погрешности распределения температуры в областях в параллельном режиме

Построение единой системы уравнений				Пообластной счет по схеме Кондрашова– Загускина			
τ	$\delta_I(t)$	$\delta_{II}(t)$	$\delta_{III}(t)$	τ	$\delta_I(t)$	$\delta_{II}(t)$	$\delta_{III}(t)$
0,00125	0,13	0,34	0,85	0,00125	0,29	0,19	1,31

Таблица 4

Результаты расчетов на эффективность распараллеливания

Кол-во процессоров	Область 1		Область 2		Область 3	
	Кол-во точек	Кол-во процессоров	Кол-во точек	Кол-во процессоров	Кол-во точек	Кол-во процессоров
3	32000	1	35000	1	40000	1
6	32000	2	35000	2	40000	2
12	32000	4	35000	4	40000	4
24	32000	8	35000	8	40000	8
N	Время расчета, с			Эффективность всей задачи, %		
3	757,45			100,0		
6	461,89			82,9		
12	242,25			78,2		
24	124,17			76,3		

Заключение

В методике МИМОЗА реализован метод построения единой системы линейных алгебраических уравнений для решения двумерного уравнения теплопроводности в многообластной постановке. Успешное решение данной задачи было связано в первую очередь с разработкой эффективного метода расчета потоков тепла на границах математических областей. Реализованный алгоритм построения единой системы уравнений по всей задаче был направлен на устранение эффекта возникновения неустойчивости на границах математических областей при проведении пообластного счета по схеме Кондрашова–Загускина.

Создана параллельная версия программы, позволяющая проводить производственные и методические расчеты с использованием описанного метода на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью.

Проведены тестовые расчеты в последовательном и параллельном режимах для проверки работоспособ-

ности созданной в рамках методики МИМОЗА программы решения двумерного уравнения теплопроводности с использованием метода построения единой системы линейных алгебраических уравнений. Полученные результаты показывают хорошее согласие численных расчетов с аналитическим решением и данными, полученными по программе пообластного счета. Кроме того, приводятся результаты расчетов на эффективность распараллеливания описанного метода.

Литература

1. Софронов И. Д., Афанасьева Е. А., Винокуров О. А., Воропинов А. И., Змушко В. В., Плетнев Ф. А., Рыбаченко П. В., Сараев В. А., Соколова Н. В., Шамраев Б. Н. Комплекс программ МИМОЗА для решения многомерных задач механики сплошной среды на ЭВМ Эльбрус-2 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1990. Вып. 2. С. 3–9.

2. Загускин В. Л., Кондрашов В. Е. О счете уравнений теплопроводности и газовой динамики прогонкой по отдельным областям. ДАН СССР, 163:5, 1965. С. 1107–1109.

3. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М: Наука, 1966.

4. Самарский А. А. Теория разностных схем. М: Наука, 1977.

5. Софронов И. Д., Винокуров О. А., Змушко В. В., Плетенев Ф. А. Комплекс программ МИМОЗА // Современные методы проектирования и отработки ракетно-артиллерийского вооружения. ВНИИЭФ, Саров, 2000.

6. Артемьев А. Ю., Бартенев Ю. Г., Басалов В. Г., Бондаренко Ю. А., Варгин А. М., Голубев А. А., Ерзунов В. А., Ломтев А. В., Максимов А. С., Панов А. И., Прокофьев А. И., Романова М. Д., Фролова Н. В., Щаникова Е. Б. Библиотека решателей разреженных линейных систем. Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. Научно-исследовательское издание. Саров. 2004. Вып. 7. С. 80–95.

7. Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Горев В. В., Делов В. И., Зубов Е. Н., Матвеев Ю. М., Моренко А. И., Соколов С. С., Шемарулин В. Е. Описание набора тестов для методик и программ, предназначенных для решения двумерных задач теплопроводности // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1992, № 2. С. 14–20.